



TITLE:

5.液体金属の圧縮率と構造因子(液体金属の構造および物性に関するシンポジウム,研究会報告)

AUTHOR(S):

千原, 順三

CITATION:

千原, 順三. 5.液体金属の圧縮率と構造因子(液体金属の構造および物性に関するシンポジウム,研究会報告). 物性研究 1972, 17(4): 291-293

ISSUE DATE:

1972-01-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88395>

RIGHT:

参 考 文 献

- 1) M.Hasegawa and M.Watabe : to be published in J. phys. Soc. Japan 32 No1 (1972)
- 2) N.W.Ashcroft : phys. Letters 23 (1966) 48
; J. phys. C (Proc. Phys. Soc.) 1 (1968) 232.
- 3) N.W.Ashcroft and J.Lekner : Phys. Rev. 145 (1966) 83.
- 4) J.Jarzynski et al : Phys. Rev. 178 (1969) 288.
- 5) G.M.B.Webber and R.W.B. Stephens : Physical Accoustics edited by W.P.Mason (Academic Press, New York, 1968) Vol. WB , P.53.

5. 液体金属の圧縮率と構造因子

原 研 千 原 順 三

液体金属と非金属液体のちがいが, dynamic structure factor や structure factor にどのようにあらわれるか否かは, 今まででは, 実験的にも理論的にも明確ではない。ここで液体金属をイオンと電子の mixture として, 電子についてのみ量子力学的にとりあつかう。

イオンの density response functionは,

$$\chi_Q^{11}[Z] = \frac{\chi_1^0(Q, Z)}{1 - n_1 \beta v_1^*(Q, Z) \chi_1^0(Q, Z)} \quad (1)$$

とかける。ここで,

$$v_1^*(Q, Z) = v_1 \left\{ 1 - \frac{v_{12}}{v_1 v_2} \frac{\epsilon_2^{-1}}{\epsilon_2} \right\}$$

$$n_1 \beta v_1 = -(H_1 + H_1 H_2 U_2 - H_{12} H_{21} U_2) / \Delta$$

$$n_2 \beta v_2 = - (H_2 U_2 + H_1 H_2 U_2 - H_{12} H_{21} U_2) / \Delta$$

$$\sqrt{n_1 n_2} \beta v_{12} = -H_{12} / \Delta$$

$$\Delta \equiv 1 + H_1 + U_2 H_2 + H_1 H_2 U_2 - H_{12} H_{21} U_2$$

$$H_1 \equiv S(Q) - 1, \quad H_2 \equiv \left(\frac{\chi_Q^{(2)}}{U_2} - 1 \right) / U_2$$

$$\chi_Q^{(2)} \equiv \langle \rho_Q : \rho_Q \rangle, \quad U_2 \equiv \frac{1}{N_2} \frac{1}{\pi \beta} \sum_P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1}$$

$$\times \text{Im} \{ G_{P+Q/2}^R(\varepsilon) G_{P-Q/2}^R(\varepsilon) \}$$

v_1, v_2, v_{12} は mixture の direct correlation function の量子力学的な拡張になっている。 $\varepsilon_2(Q, Z)$ は、電子の dielectric constant である。

イオンの零音波の周波数が $\omega \sim 10^{13} \text{ sec}^{-1}$ にたいし、電子のプラズマ振動は、 10^{15} sec^{-1} 位であるから、(1)式にあらわれる $v_1^*(Q, Z)$ の Z を 0 とおける。このとき $v_1^*(Q, 0) = 1/S(Q) - 1$ となることが示される。このことから neutron scattering で測定される領域では、液体金属を一成分系としてあつかうことからのずれは、あまりないと予想できる。そして液体金属の特徴は、 $S(Q)$ を通じてしかあらわれないことになる。

イオンの structure factor に関しては、イオン-イオンのポテンシャルを hard sphere とクーロン力の和、イオン-電子間のポテンシャルを Cohen のモデル・ポテンシャルを用い、さらに

$$\sqrt{n_i n_j} \beta \nabla v_{ij} = (\nabla \phi_{ij} g_{ij}(r))$$

の近似を用いることにより、次のことがいえる。金属として特徴は $S(Q)$ の Q の小さいところにあらわれる。とくに $Q \rightarrow 0$ をとることにより、次の関係式が成立する。

$$S_{11}(0) = 1/B = n_1 \chi_T / \beta$$

$$S_{22}(0) = x_{Q=0}^{22} = Z/B$$

$$S_{12}(0) = x_{Q=0}^{12} = \sqrt{Z/B} \quad (2)$$

$$\text{ここで } B = Z/U_2 + 1 + 8\eta \frac{(1+\eta k)}{(-\eta)^2} - \frac{4\pi(n_1 r_c^3)}{3} \beta A$$

電子の self-energy を 0 とすると、圧縮率をきめる B の第一項は $\frac{2}{3} \frac{Z E_F}{k_B T}$ となり、Bohm-Staver の結果を与える。 B で与えられる圧縮率は、電子の self-energy, hard-sphere の寄与をとり入れた圧縮率を与えている。

6. 中性子散乱で観測される液体金属の動的構造

— その理論的展望 —

日本原子力研究所 小 幡 行 雄

以前に古典液体による中性子散乱の問題点について review した¹⁾ことがあるが、今回はその折にふれなかったこと、および最近の発展と問題点について概説しよう。

§ 1. 固体と液体との相違

中性子散乱で見ているのは時間にして $\sim 10^{-13}$ 秒、空間にして $\sim 1 \text{ \AA}$ 位の間の変動である。低温の固体のモデルとして Debye モデルをとれば、動的構造因子 $S(Q, \omega)$ は干渉性散乱、非干渉性散乱とも液体のそれとは定性的にもことなる²⁾。しかし非調和項を考慮すれば両者の差は固体の温度を上げるにつれて減少する。このことは有限個の原子の集りとして固体の格子力学を計算機で扱った例³⁾でも示され、また隔点直下の Al の単および多結晶、直上の液体 Al の中性子散乱の実験⁴⁾でも多結晶と液体による散乱スペクトルの強い類似性によ